

Title	不規則系の松原-豊沢モデルについての数値的研究(基研モレキュール型研究会,基研研究会報告)
Author(s)	松田, 博嗣; 宮田, 隆
Citation	物性研究 (1972), 18(5): F19-F29
Issue Date	1972-08-20
URL	<a href="http://hdl.handle.net/2433/88484">http://hdl.handle.net/2433/88484</a>
Right	
Type	Departmental Bulletin Paper
Textversion	publisher

## 不規則系の松原-豊沢モデルについての数値的研究

京大基研      松    田    博    嗣  
名 大 理      宮    田            隆

不規則系の一電子モデルの状態密度  $D(E)$  の特徴は、多くの研究によってかなり明らかになった。これに対して固有関数の特性、およびそれに依存する諸物性については、漸く 1次元系についていくらかはっきりしたことが言えるようになった段階〔本報告 石井・松田の項参照〕で、2次元以上では幾多の理論が提出されてはいるものの、その何れもまだ憶説の域を脱していないのが現状である。無限に長い 1次元不規則系における一電子波動関数の振舞は、周期系のそれとはほとんど常に質的に異なるものであり、その質的差異は周期性よりの外れの強さとか、電子エネルギー  $E$  などに依存することなく、ほとんど常に存在することが示される。

これに対して、2次元以上では周期性よりの外れの強さを適当な量（例えばバンド巾と site energy の分布の巾の比など）で表わすと、この量に臨界値があつて、その上下で固有関数の局在化が起ったり、起らなかったりする Anderson 転移とか、エネルギーにもこのような臨界値があつて、いわゆる易動度ギャップが存在することなどが主張されている。われわれは不規則系の固有関数の実態と電気伝導度との関連を知り、上記の主張の当否に対する探りを入れる目的で、不規則系の松原-豊沢モデル（以下 M-T モデルと略称）について計算機による数値的研究を行なってきた。

M-T モデルは次のような Hamiltonian で記述される電子系である。

$$H = \sum_{m \neq n} \sum V_{mn} a_m^+ a_n \quad (1)$$

ここに  $m, n$  は空間的に完全に不規則に分布する不純物 site の番号で、site  $m$  の座標を  $R_m$ ,  $a_m^+$  ( $a_m$ ) はそこに電子を生成（消滅）する演算子であり、

$$\left. \begin{aligned} V_{mn} &= V(|R_m - R_n|) \\ V(R) &= -V_0 (1 + \alpha R) e^{-\alpha R}, \quad (V_0 > 0, \alpha > 0) \end{aligned} \right\} \quad (2)$$

である。

2次元において、 $N$ 個 ( $N \sim 100$ ) の不純物 site が空間的に全く不規則に分布する種々の標本を作り、周期的境界条件の下でそれについてエネルギーの固有値、固有関数を求めると、多くの場合、固有関数は空間的に局在している。エネルギーの大きい順に番号付けして  $\nu$  番目の固有関数の site  $n$  における振巾を

$$x_{\nu, n} \left( \sum_{n=1}^N x_{\nu, n}^2 = 1 \right)$$

その局在度を

$$\mathcal{L}_{\nu} = \sum_{n=1}^N \left( x_{\nu, n}^2 - \frac{1}{N} \right)^2 \quad (3)$$

で定義すると、 $\mathcal{L}_{\nu}$  は当然標本と  $\nu$  に依存するが、数値計算の結果によれば、それはほぼ有効不純物濃度

$$p \equiv 32 \pi n^{3/2} / \alpha^3 \quad (n: \text{単位面積当りの site 数})$$

と  $\nu$  に対応する固有エネルギー  $E = E_{\nu}$  [ただし  $V_0 = 1$  と取ることにする] で定まる連続関数となることが判るので、これを  $\mathcal{L}(E, P)$  または単に  $\mathcal{L}(E)$  と書くことが出来る。種々の  $p$  に対する  $S_{\nu}$  の  $\nu$  依存性は第1図に示すように濃度  $p$  の大中小によって特徴的な形をもっている。第2図には種々の  $p$  に対する  $\mathcal{L}(E)$  と  $D(E)$  の  $E$  の  $E$ -依存性を示す。

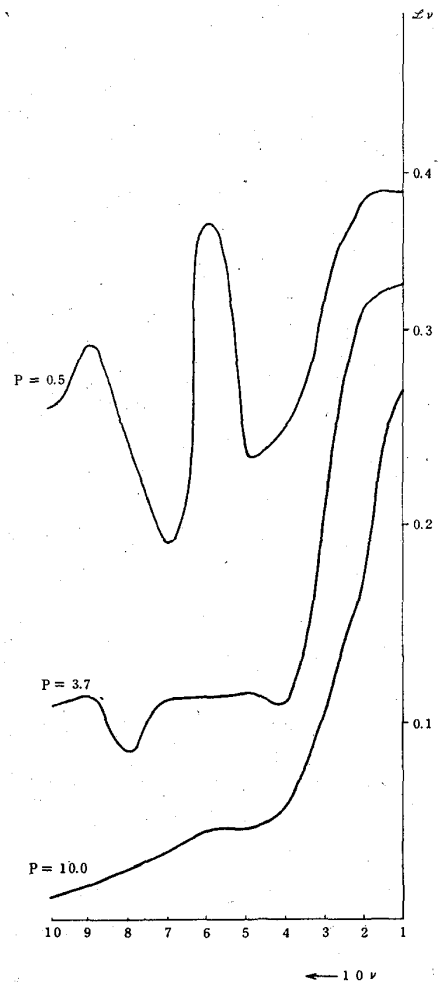
一方電流を

$$\mathbf{J} = \frac{ie}{h} \left[ H, \sum_m \mathbf{R}_m a_m^{\dagger} a_m \right] \quad (4)$$

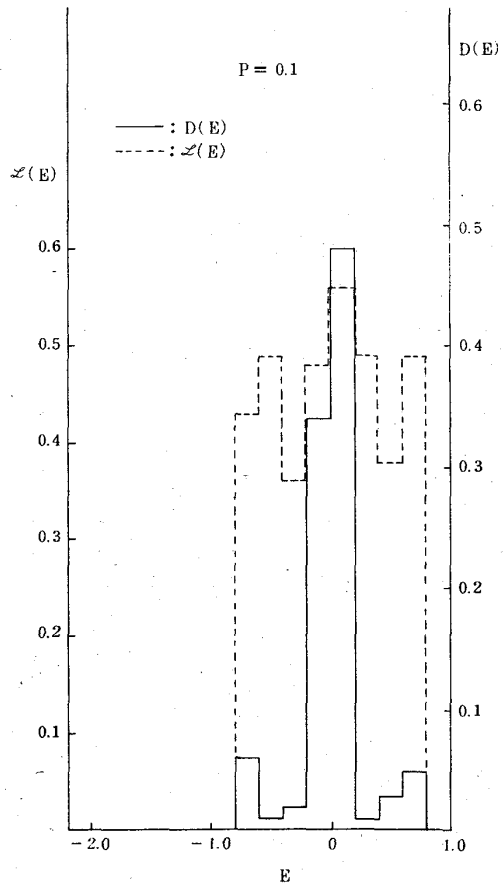
で定義すると、

$$\mathbf{J}_{\mu\nu} = \mathbf{J}(E_{\mu}, E_{\nu})$$

$$= \frac{ie}{h} \sum_{m \neq n} \sum (\mathbf{R}_m - \mathbf{R}_n) V_{mn} x_{\mu, m} x_{\nu, n} \quad (5)$$

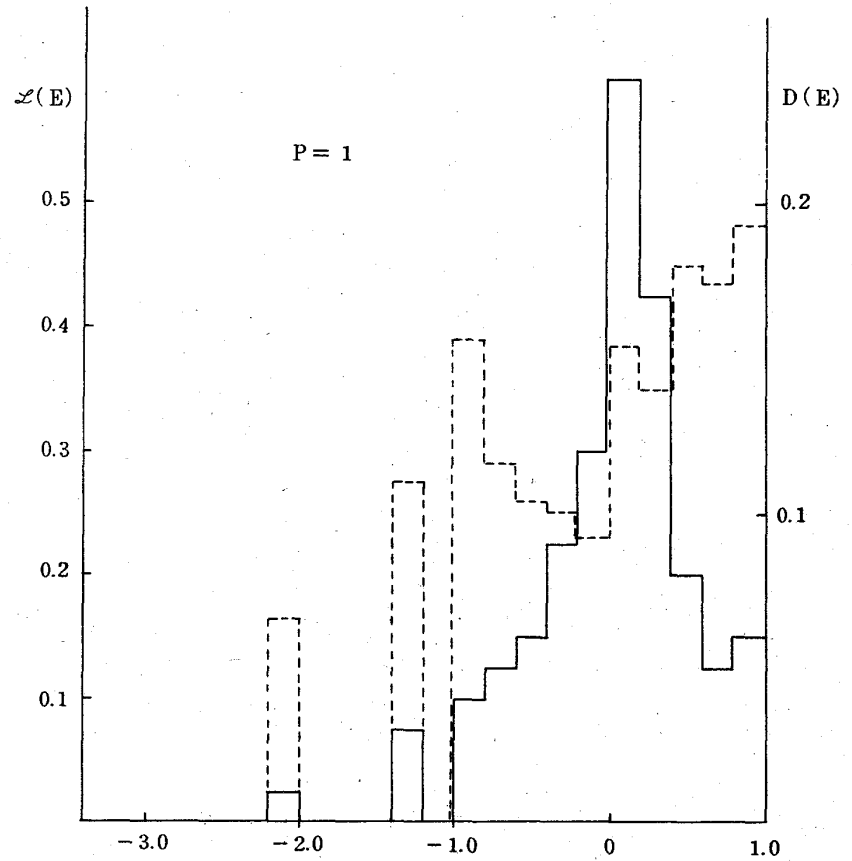


第 1 図

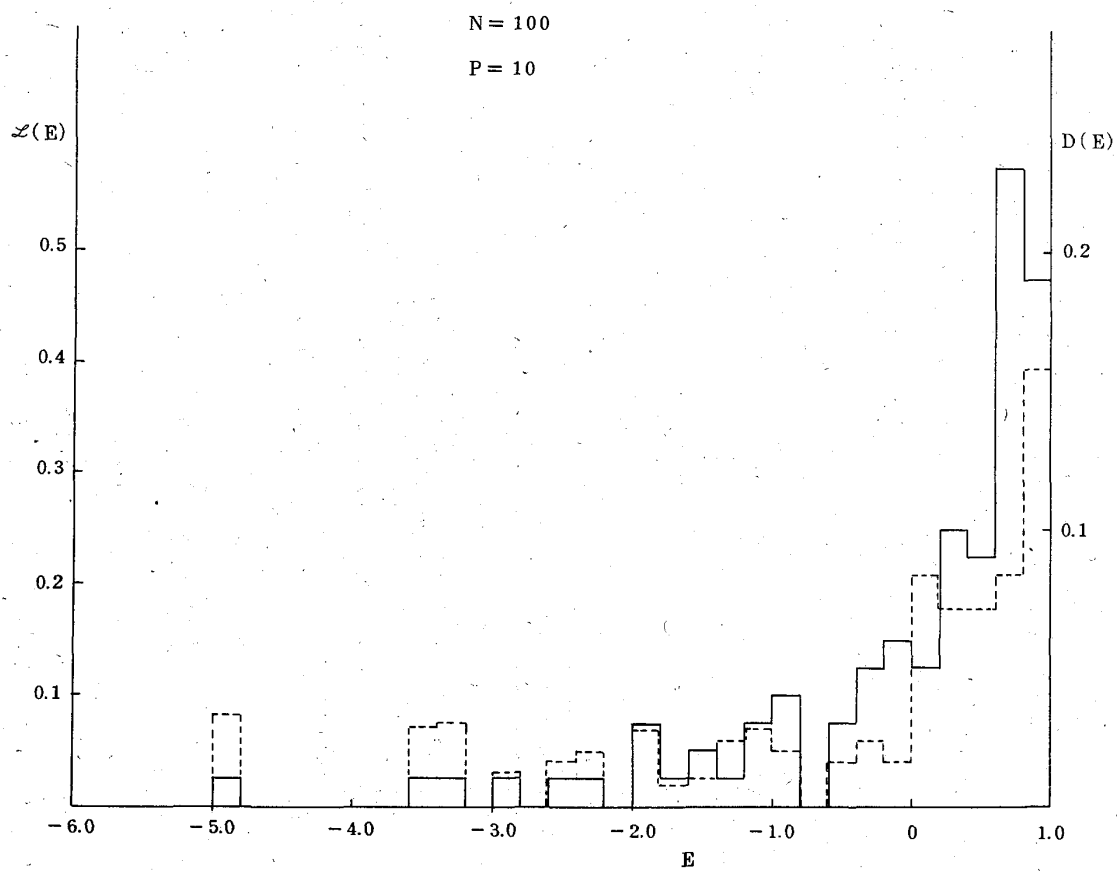
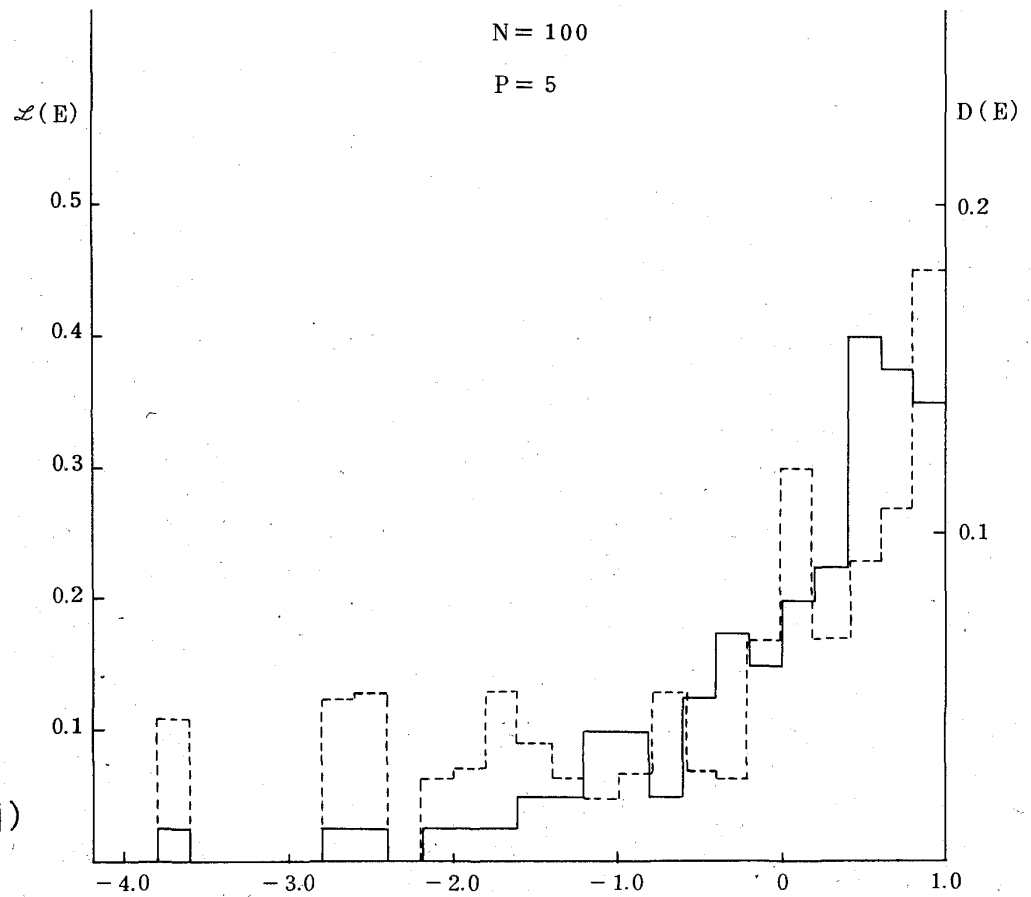


第 2 図 (i)

第 2 図 (ii)



第 2 図 (iii)



第 2 図 (iv)

となり、 $0^\circ\text{K}$ の静的電気伝導度はFermiエネルギー  $E_F$  のとき、

$$\sigma = \sigma(E_F) = |J(E_F, E_F + 0)|^2 |D(E_F)|^2 \quad (6)$$

で与えられる。 $J(E_\mu, E_\mu + 0)$ を求めるのに、それに対する極端な2つの場合より近似として、

$$J_\mu^2(1) \equiv \frac{1}{2} (J_{\mu, \mu+1}^2 + J_{\mu, \mu-1}^2) \quad (7)$$

および

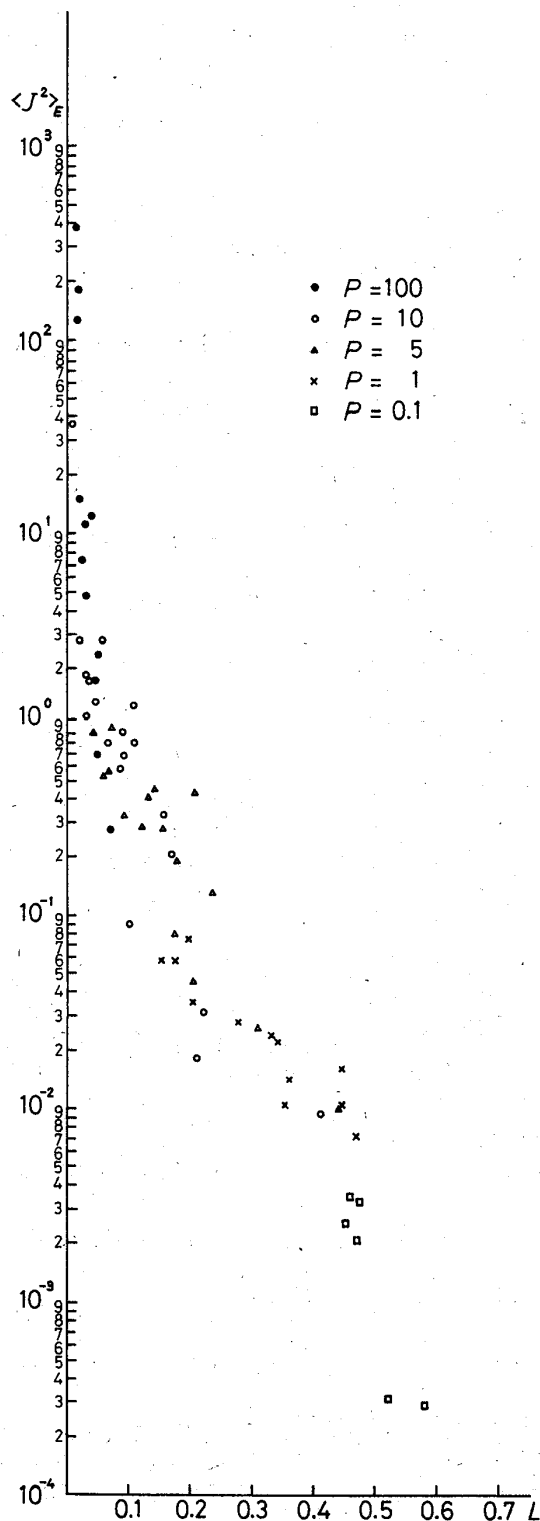
$$\overline{J_\mu^2} \equiv \frac{1}{N-1} \sum_{\substack{\nu=1 \\ (\nu \neq \mu)}}^N J_{\mu, \nu}^2 \quad (8)$$

をそれぞれ計算してみると、両者の不一致はたかだか因数10程度で、一方これらの値自体は  $p, E$  によって因数  $10^6$  程度の拡がりをもつので、一応  $\overline{J_\mu^2}$  で近似することとし、 $E$  の近傍エネルギー巾  $\delta \simeq 0.2$  の level について  $\overline{J_\mu^2}$  を平均したものを  $\langle J^2 \rangle_E$  とすると、第3図に示すように、局在度  $\mathcal{L}(E)$  とこれは強い負の相関が見られる。かくて  $\langle J^2 \rangle_E$  は元来  $E$  と  $p$  の関数であるが、その大きさの程度は対応する  $\mathcal{L}(E)$  で定まることが判った。

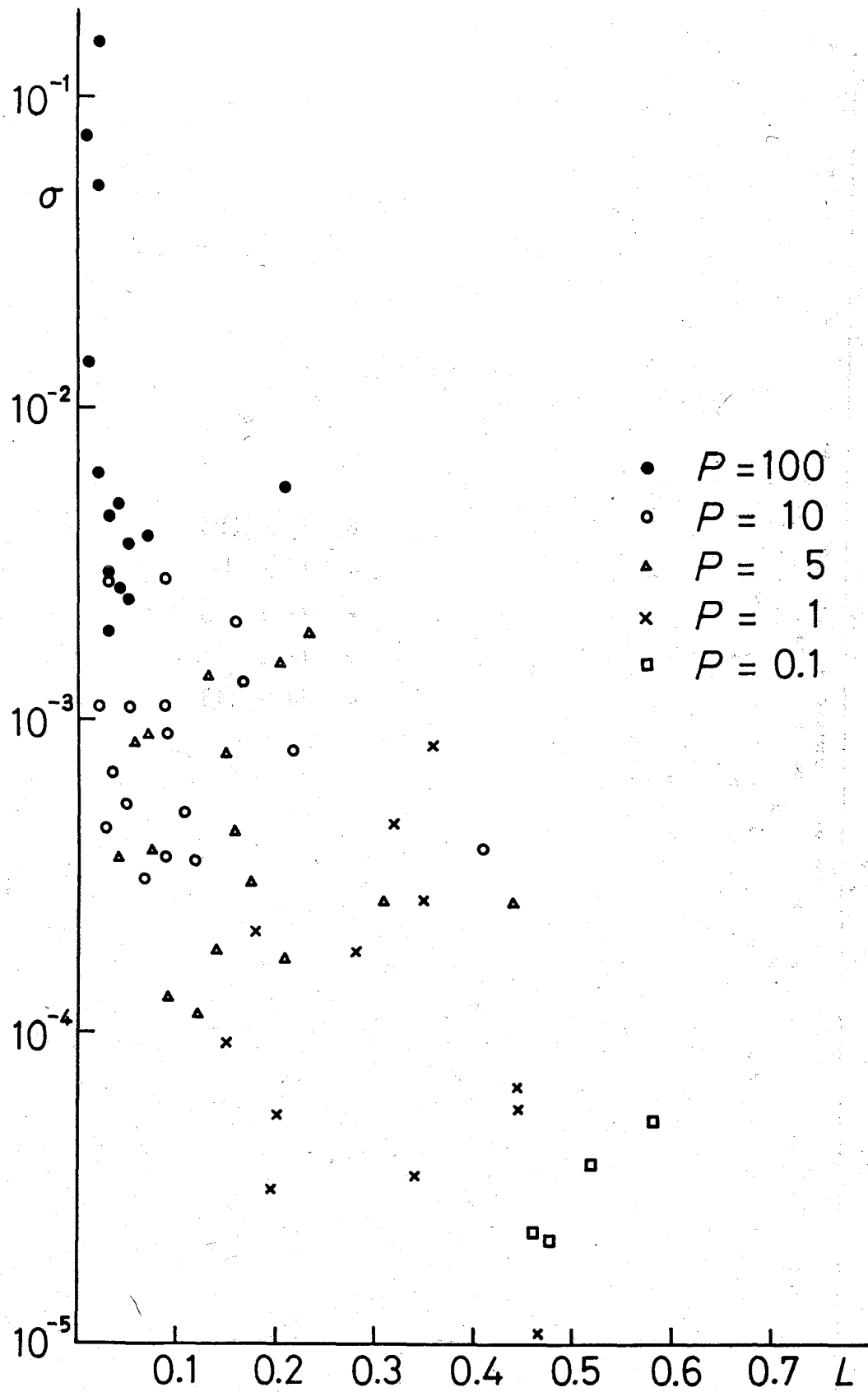
一方第2図に見られるように  $D(E)$  は  $\mathcal{L}(E)$  とむしろ弱い正の相関をもつために、第4図に示すように  $\sigma(E)$  と  $S(E)$  の相関は正ではあるが弱く、同じ  $\mathcal{L}(E)$  に対しても  $\sigma(E)$  の値はかなりのばらつきを示している。さらに  $\sigma(E)$  とは第5図に見られるようにほとんど無相関である。

さて、現実の系では  $N \gg 1$  であり、このとき  $\mathcal{L}(E) = O(1)$  ならば固有関数は局在しており、 $S(E) = O(1/N)$  ならば非局在である。 $E, p$  の値を変えたとき、果してこの2つの場合の間の転移が起るかどうかなを見るために、与えられた  $p$  に対する  $\mathcal{L}(E)$  を種々の  $N$  について5個の標本についての平均を求め、そして得られた  $\mathcal{L}(E)$  を  $1/N$  に対して第6図にプロットした。これより  $N \rightarrow \infty$  に外挿すると、ほとんど大部分の場合  $\mathcal{L}(E) = O(1)$  で、固有関数は局在している。 $p = 100$  のような高濃度の場合は見方によっては  $\mathcal{L}(E) = O(1/N)$  とも見られるが、各  $N$  ごとに  $\mathcal{L}_{\min} \equiv \min_E \mathcal{L}(E)$  をプロットすると、それはほとんど  $N$  によらず一定で、これからは  $\mathcal{L}(E) = O(1)$  と考えられる。第7図には  $\mathcal{L}_{\min}$  と  $\mathcal{L}_{\max} \equiv \max_E \mathcal{L}(E)$  を  $\log p$  に対してプロットした。標本の数が少ないためプロットにはかなりの“ばらつき”があり、断言は出来ないが、第6図、第7図よりし

てN-Tモデルの固有関数は大きい $p$ に対しても依然局在しがちであり、果してこの点に関して2次元は1次元と本質的に異なるかどうか疑問である。従って、易動度ギャップとかAnderson転移に対する主張は、われわれの場合、直ちには首肯しがたい。ただし第7図より $\mathcal{L}_{\min}$ の曲線は $p \simeq 5$ に変曲点があり、もし上記転移があるとなれば、その近傍が問題になるであろう。

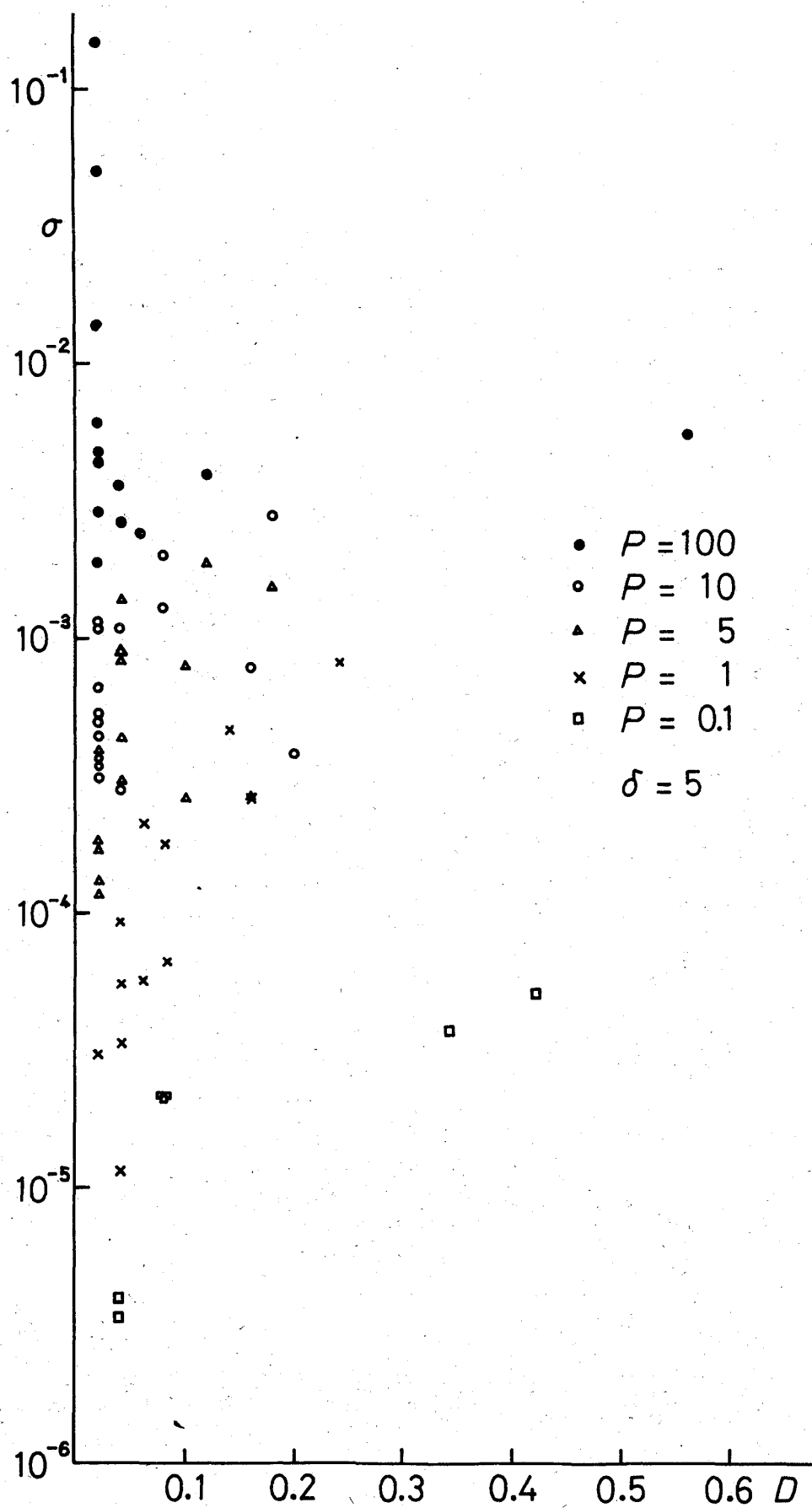


第 3 図



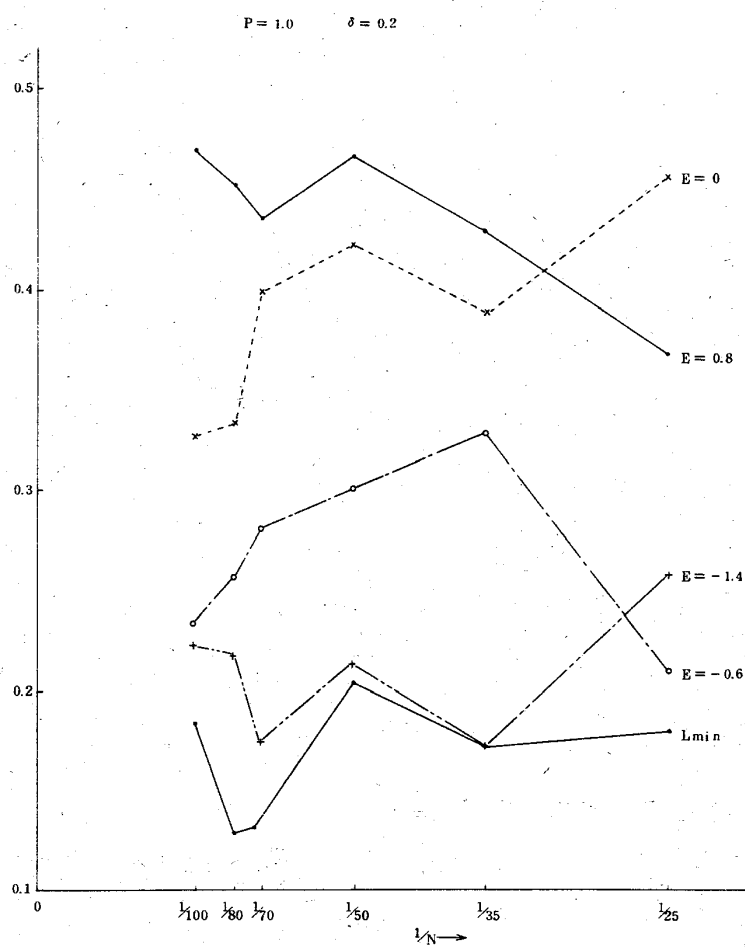
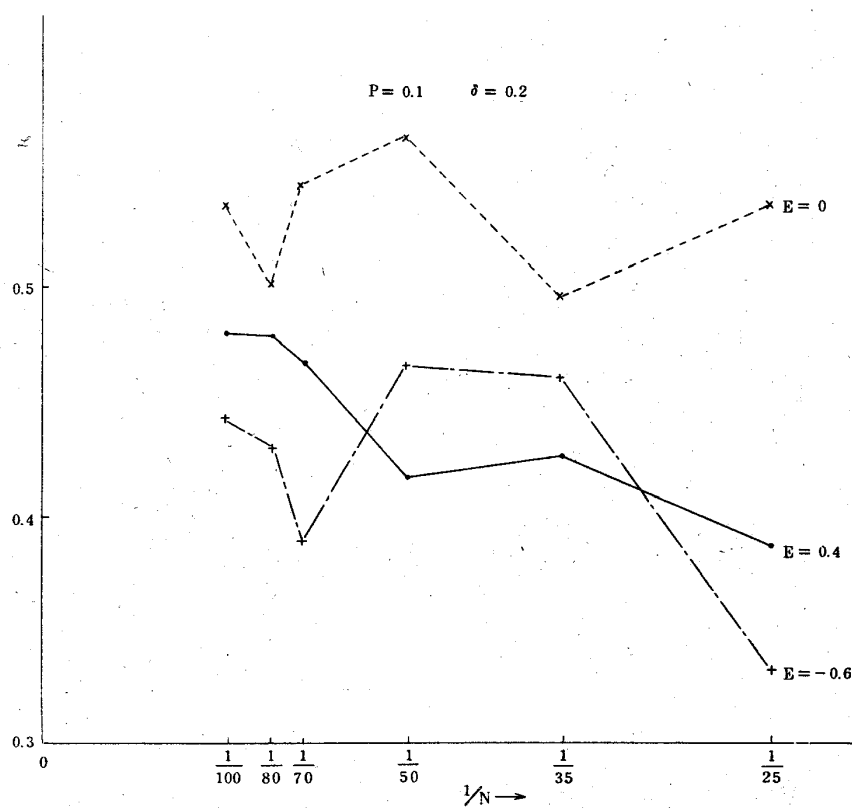
第 4 図





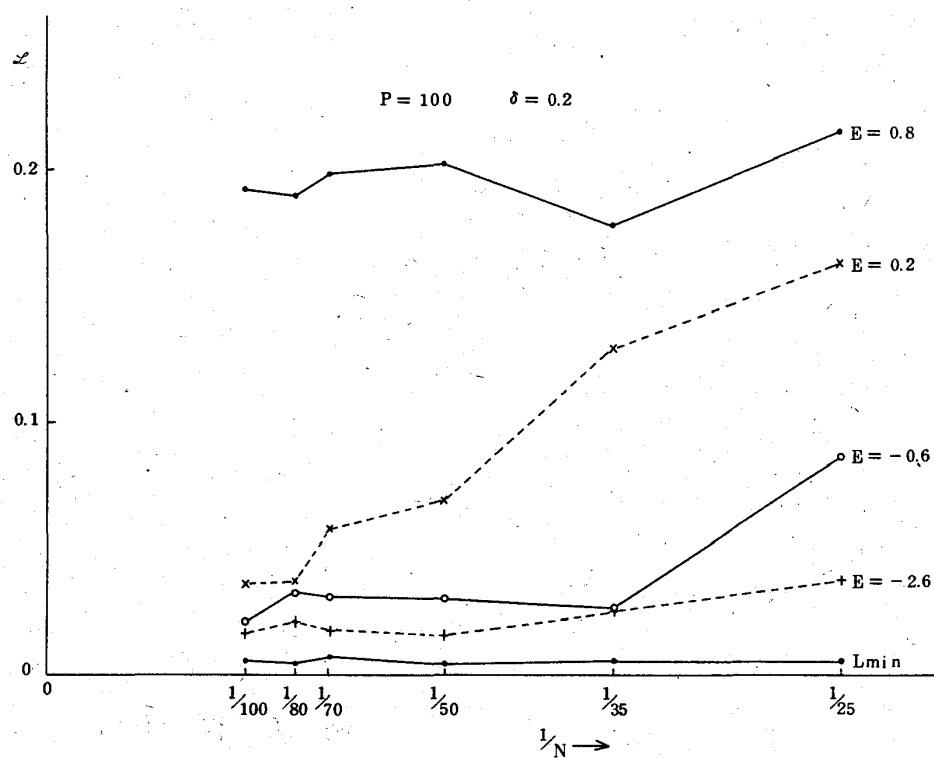
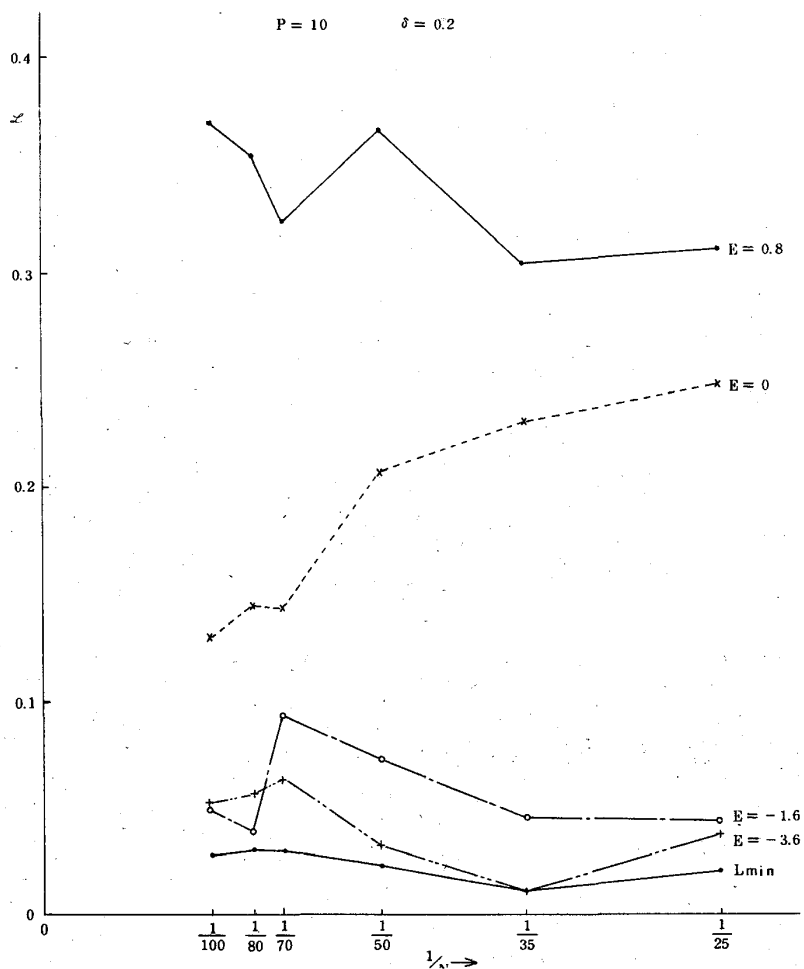
第 5 図

第 6 図 (i)

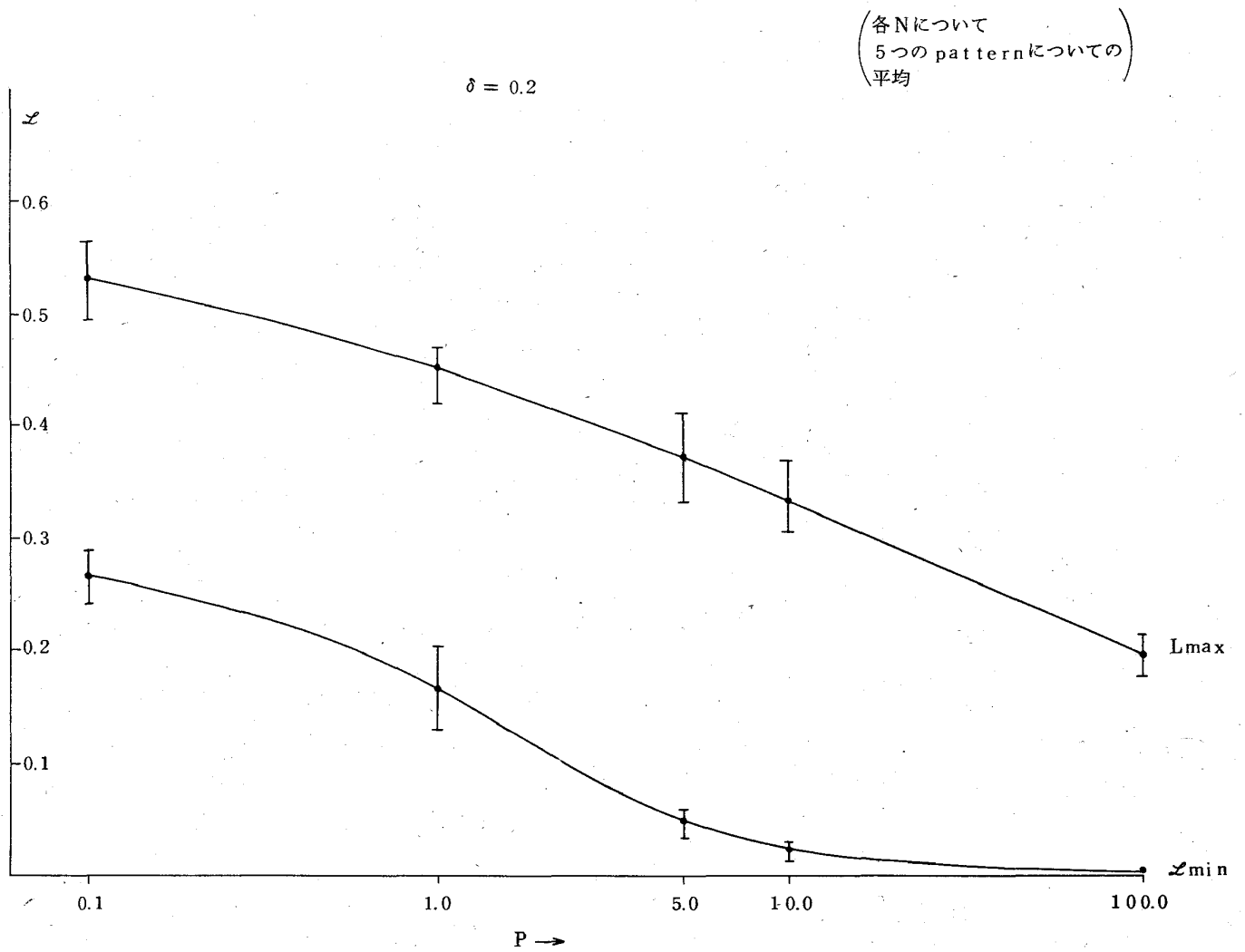


第 6 図 (ii)

第 6 図 (iii)



第 6 図 (iv)



第 7 図